

Mecánica y Dinámica Molecular con Forcite en Materials Studio

Javier Ramos

**Biophysics of Macromolecular Systems group
(BIOPHYM)**

**Departamento de Física Macromolecular
Instituto de Estructura de la Materia – CSIC
j.ramos@iem.cfmac.csic.es**

Webinar, 28 de Mayo 2014

Introducción a Materials Studio en la Investigación Química y de Ciencias de los Materiales

Javier Ramos

Biophysics of Macromolecular Systems group
(BIOPHYM)

Departamento de Física Macromolecular
Instituto de Estructura de la Materia – CSIC
j.ramos@iem.cfmac.csic.es

También el archivo de la presentación y el vídeo están disponibles en la siguiente dirección:

<http://digital.csic.es/handle/10261/96382> (Presentación)

https://www.youtube.com/watch?v=go8Mer_uk_4 (Video)

Índice

- *¿Por que hacemos simulación?.*
- *Herramientas computacionales.*
- *Definición de un modelo molecular en MM clásica.*
- *¿Que podemos y no podemos hacer con Forcite?*
- *Mecánica y Dinámica Molecular en Materials Studio : FORCITE*
 - *FORCITE - Calculation*
 - *FORCITE - Analysis*
 - *FORCITE - ForceField Manager*
- *Ejemplo 1 - Politiofenos*
- *Ejemplo 2 - Líquidos iónicos*

Por que hacemos simulación

En muchas ocasiones, los experimentos son:

- **Imposible** (Procesos que ocurren en las estrellas, predicción meteorológica)
- **Peligroso** (Simulación de vuelo o explosiones)
- **Caro** (Experimentos a alta presión, túneles de viento)
- **Escalas no accesibles** (Propiedades a cortas escalas de tiempo y pequeños tamaños difíciles experimentalmente)

Por que hacemos simulación

En muchas ocasiones, los experimentos son:

- **Imposible** (Procesos que ocurren en las estrellas, predicción meteorológica)
- **Peligroso** (Simulación de vuelo o explosiones)
- **Caro** (Experimentos a alta presión, túneles de viento)
- **Escalas no accesibles** (Propiedades a cortas escalas de tiempo y pequeños tamaños difíciles experimentalmente)

Las simulaciones son valiosos complementos de los experimentos, ya que pueden:

- **Verificar y predecir observaciones experimentales.**
- **Reemplazar experimentos.**
- **Modificar y corregir modelos teóricos.**

Por que hacemos simulación

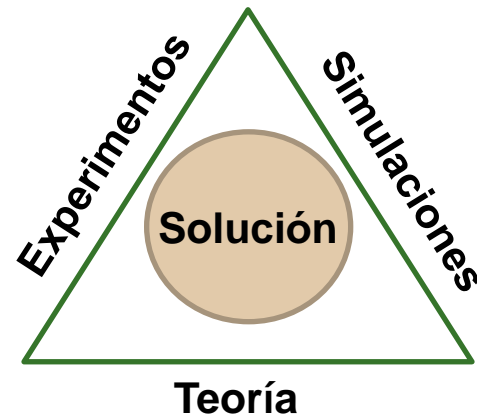
En muchas ocasiones, los experimentos son:

- **Imposible** (Procesos que ocurren en las estrellas, predicción meteorológica)
- **Peligroso** (Simulación de vuelo o explosiones)
- **Caro** (Experimentos a alta presión, túneles de viento)
- **Escalas no accesibles** (Propiedades a cortas escalas de tiempo y pequeños tamaños difíciles experimentalmente)

Las simulaciones son valiosos complementos de los experimentos, ya que pueden:

- **Verificar y predecir observaciones experimentales.**
- **Reemplazar experimentos.**
- **Modificar y corregir modelos teóricos.**

Simulaciones por ordenador se han convertido en una parte del método científico



Por que hacemos simulación

La esencia de las simulaciones por ordenador es la conexión entre el mundo microscópico (mecánica estadística) y el macroscópico (observables experimentales)

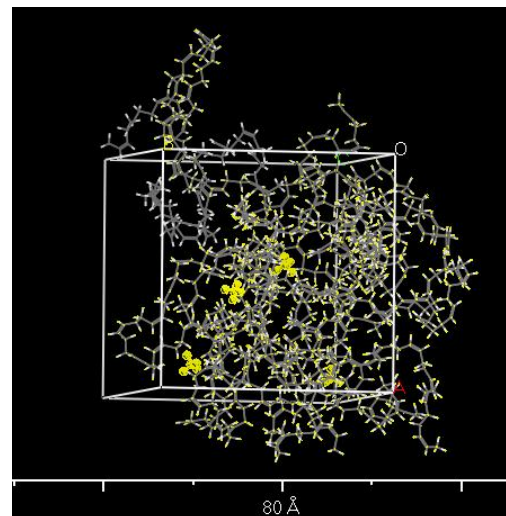
Por que hacemos simulación

La esencia de las simulaciones por ordenador es la conexión entre el mundo microscópico (mecánica estadística) y el macroscópico (observables experimentales)

Observables Macroscópicas (Energías de solvatación, Coeficientes Difusión, Densidades,...)



Promedio de observables sobre un estado microscópico seleccionado

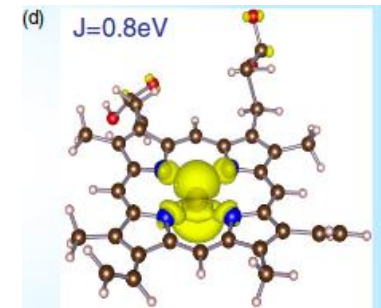


Herramientas computacionales

- **Mecánica Cuántica (QM)**

Estructura Electrónica (Ecuación de Schrödinger)

- Precisa.
- Computacionalmente cara :
Cortos tiempos para sistemas pequeños.



10-100 átomos
10-100 ps

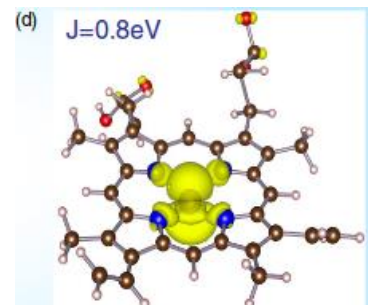
Weber et al.
PRL, 110, 106402 (2013)

Herramientas computacionales

- **Mecánica Cuántica (QM)**

Estructura Electrónica (Ecuación de Schrödinger)

- Precisa.
- Computacionalmente cara :
Cortos tiempos para sistemas pequeños.



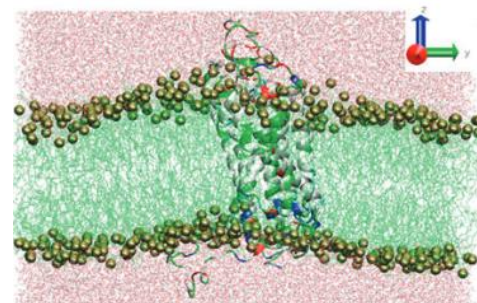
10-100 átomos
10-100 ps

Weber et al.
PRL,110,106402(2013)

- **Mecánica y Dinámica Molecular Clásica (MM/MD)**

Fuerzas empíricas (Leyes de Newton)

- Menos precisa.
- Computacionalmente rápida.



10^4 - 10^6 átomos
10-1000 ns

Ramos et al.
PhysChemChemPhys,
13,3660(2011)

Herramientas computacionales

- **Mecánica Cuántica (QM)**

Estructura Electrónica (Ecuación de Schrödinger)

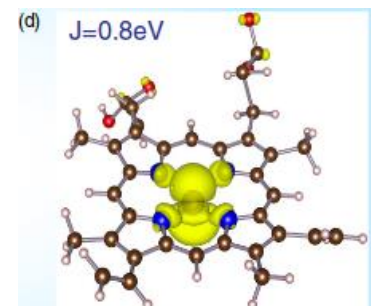
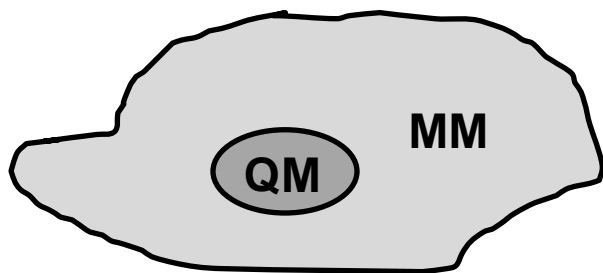
- Precisa.
- Computacionalmente cara :
Cortos tiempos para sistemas pequeños.

- **Mecánica y Dinámica Molecular Clásica (MM/MD)**

Fuerzas empíricas (Leyes de Newton)

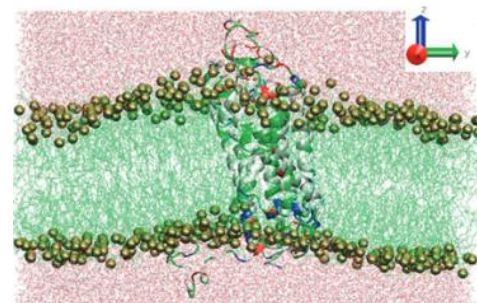
- Menos precisa.
- Computacionalmente rápida.

- **QM/MM**



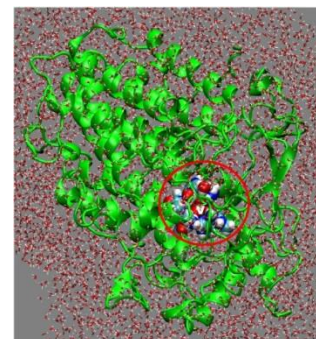
10-100 átomos
10-100 ps

Weber et al.
PRL, 110, 106402 (2013)



10^4 - 10^6 átomos
10-1000 ns

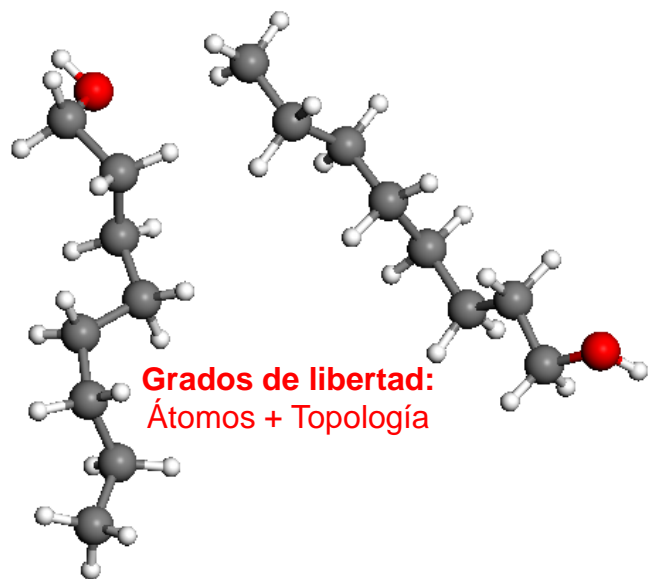
Ramos et al.
PhysChemChemPhys,
13, 3660 (2011)



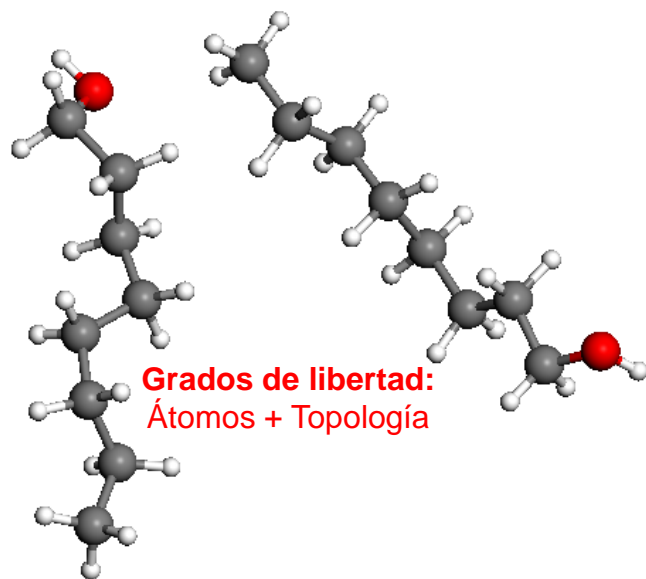
10^4 - 10^6 átomos
100-1000 ps

Geethalakshmi et al, J. Phys.
Chem. B 113, 4456 (2009)

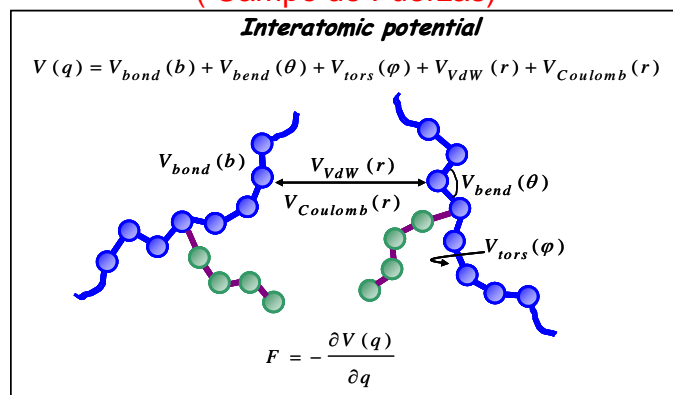
Definición de un modelo molecular en MM clásica



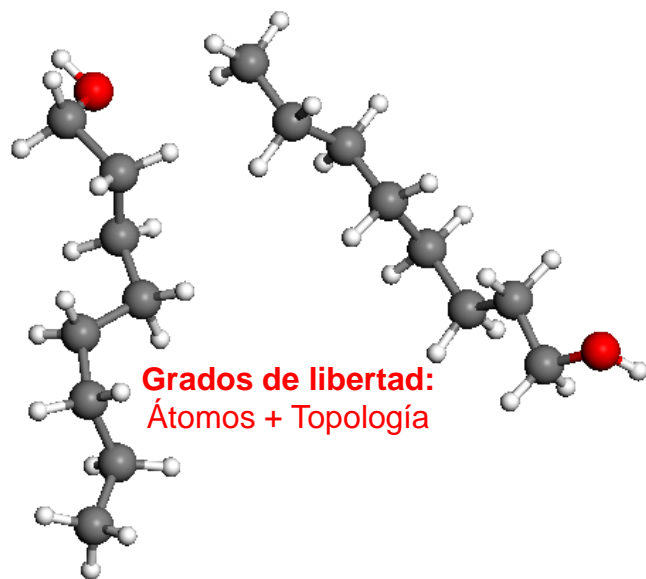
Definición de un modelo molecular en MM clásica



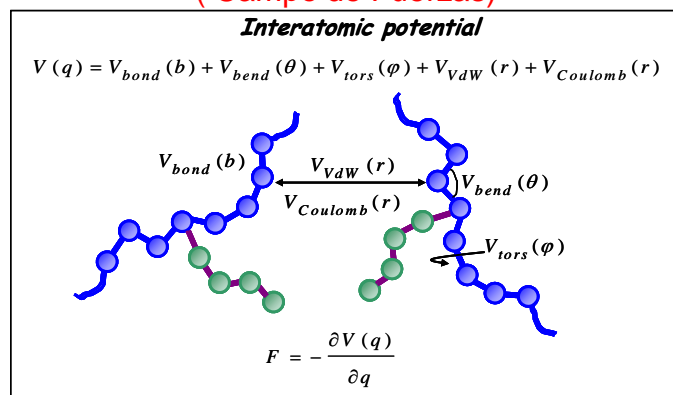
Interacciones y fuerzas entre los átomos
(Campo de Fuerzas)



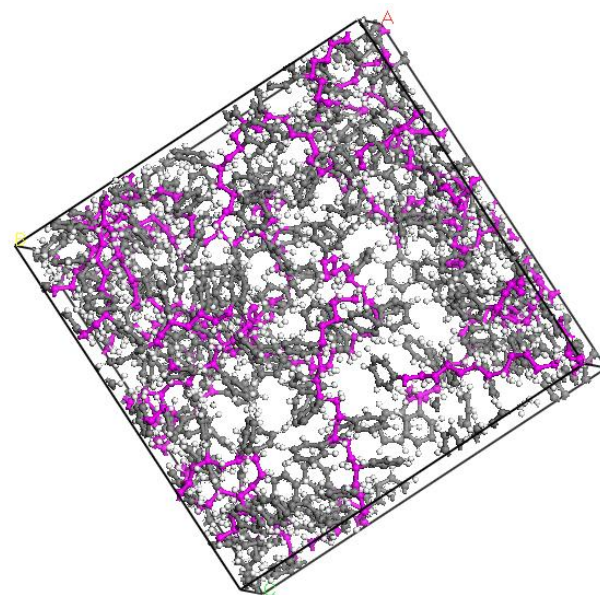
Definición de un modelo molecular en MM clásica



Interacciones y fuerzas entre los átomos
(Campo de Fuerzas)



**Periodic Boundary
Conditions & Packing**



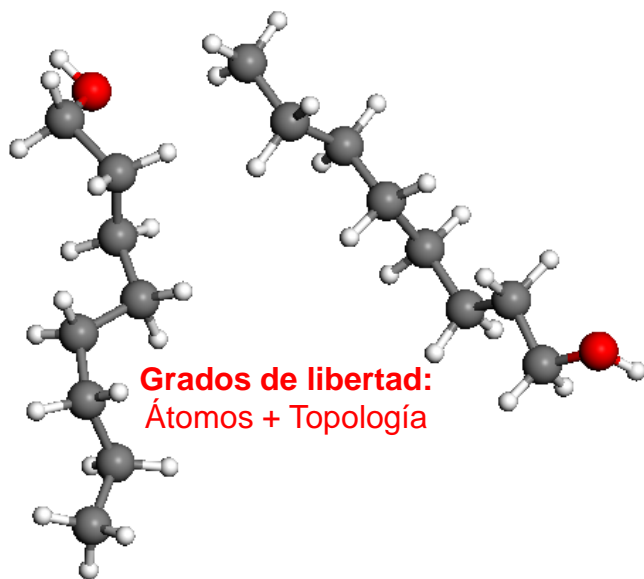
Definición de un modelo molecular en MM clásica

Método para generar configuraciones

$$\text{Equations of motion} \quad \dot{q}_j = + \frac{\partial H}{\partial p_j}$$

(Hamilton formulation)

$$H(p, q) = K(p) + V(q) \quad \dot{p}_j = - \frac{\partial H}{\partial q_j}$$

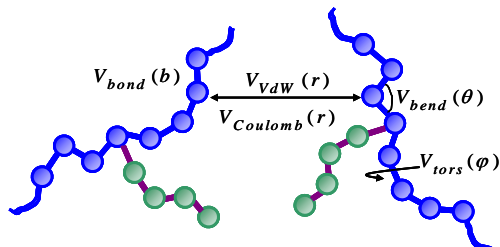


Grados de libertad:
Átomos + Topología

Interacciones y fuerzas entre los átomos (Campo de Fuerzas)

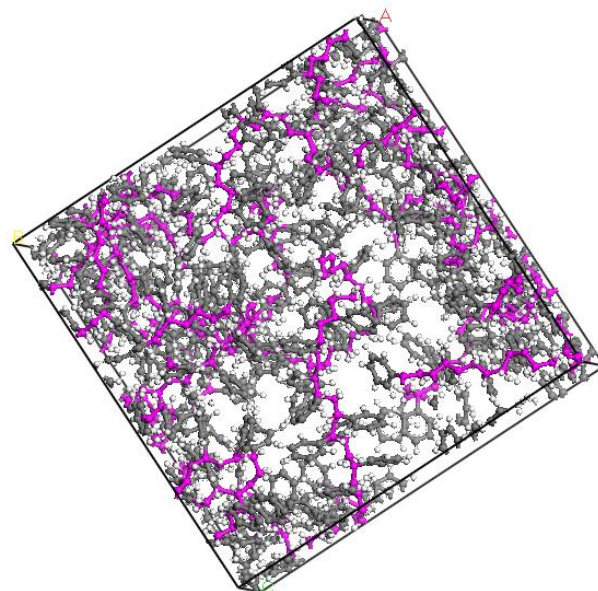
Interatomic potential

$$V(q) = V_{bond}(b) + V_{bend}(\theta) + V_{tors}(\phi) + V_{vdW}(r) + V_{Coulomb}(r)$$



$$F = - \frac{\partial V(q)}{\partial q}$$

Periodic Boundary Conditions & Packing



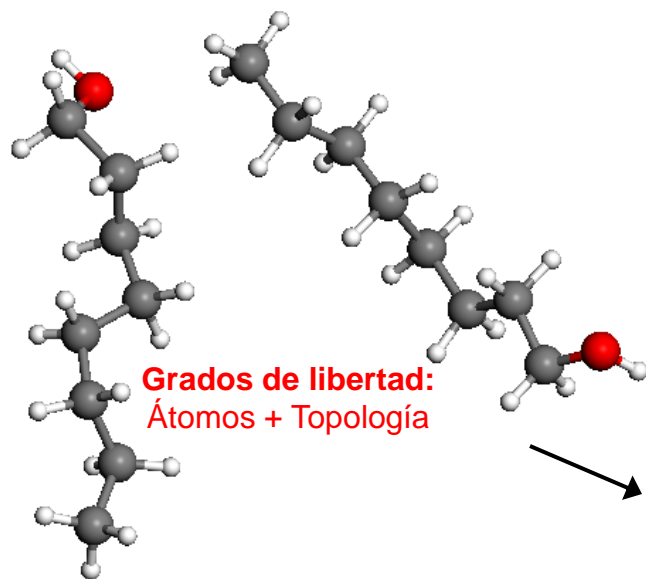
Definición de un modelo molecular en MM clásica

Método para generar configuraciones

Equations of motion
(Hamilton formulation)

$$\dot{q}_j = + \frac{\partial H}{\partial p_j}$$

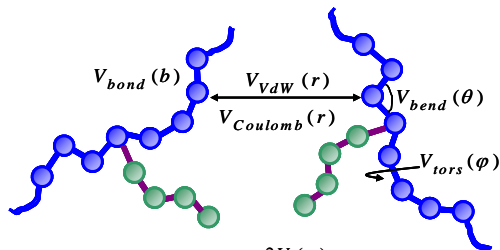
$$H(p, q) = K(p) + V(q) \quad \dot{p}_j = - \frac{\partial H}{\partial q_j}$$



Interacciones y fuerzas entre los átomos (Campo de Fuerzas)

Interatomic potential

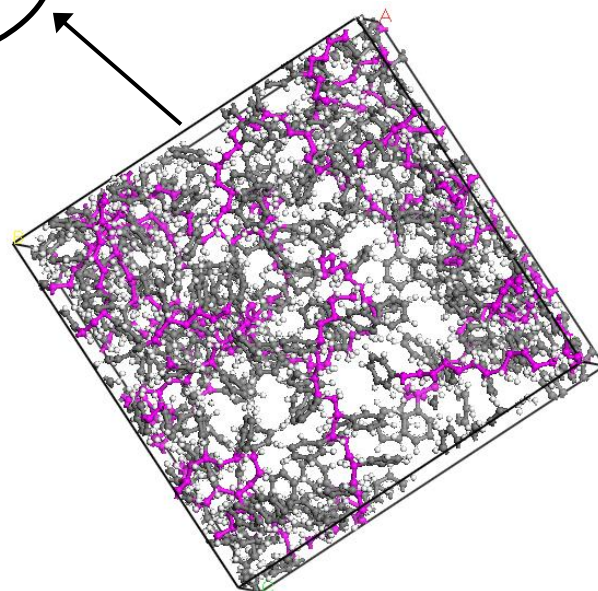
$$V(q) = V_{bond}(b) + V_{bend}(\theta) + V_{tors}(\phi) + V_{vdW}(r) + V_{Coulomb}(r)$$



$$F = - \frac{\partial V(q)}{\partial q}$$

Resultados de la
Simulación

Periodic Boundary Conditions & Packing



¿Que podemos y no podemos hacer con Forcite?



- Cálculo de energía, optimización geométrica y dinámica molecular de moléculas y sistemas periódicos.
- Optimización geométrica y dinámica molecular de estructuras cristalinas preservando la simetría.
- Amplia variedad de campos de fuerzas: Cubre casi cualquier sistema químico.
- Interfaz amigable para la preparación y análisis de simulaciones.
- Integración con otros módulos de Materials Studio que facilitan la preparación de las simulaciones.
- Permite hacer las simulaciones en “Clusters” o “Superordenadores” a través de la pasarela o mediante “scripting”.

¿Que podemos y no podemos hacer con Forcite?

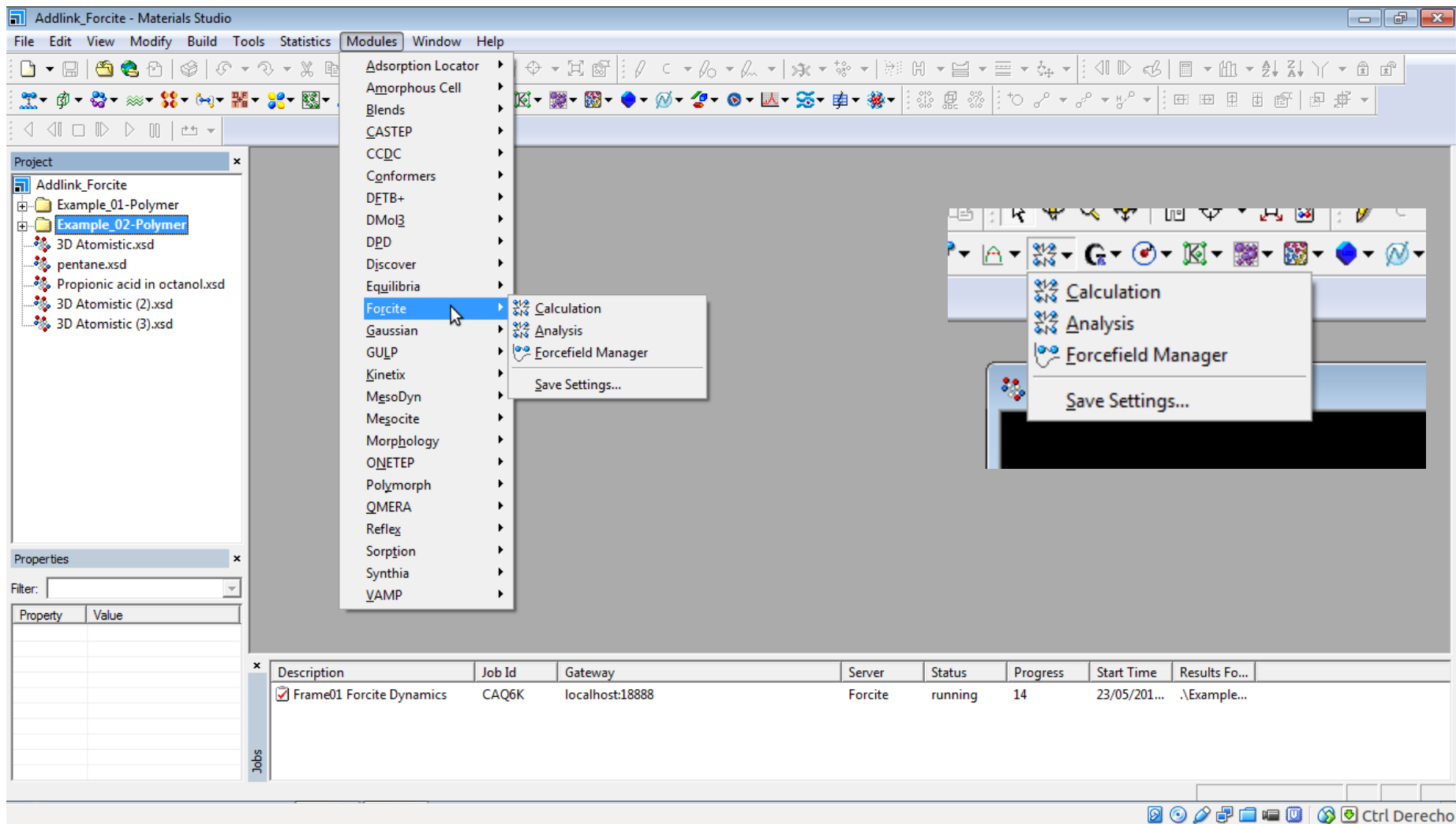


- Cálculo de energía, optimización geométrica y dinámica molecular de moléculas y sistemas periódicos.
- Optimización geométrica y dinámica molecular de estructuras cristalinas preservando la simetría.
- Amplia variedad de campos de fuerzas: Cubre casi cualquier sistema químico.
- Interfaz amigable para la preparación y análisis de simulaciones.
- Integración con otros módulos de Materials Studio que facilitan la preparación de las simulaciones.
- Permite hacer las simulaciones en “Clusters” o “Superordenadores” a través de la pasarela o mediante “scripting”.



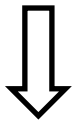
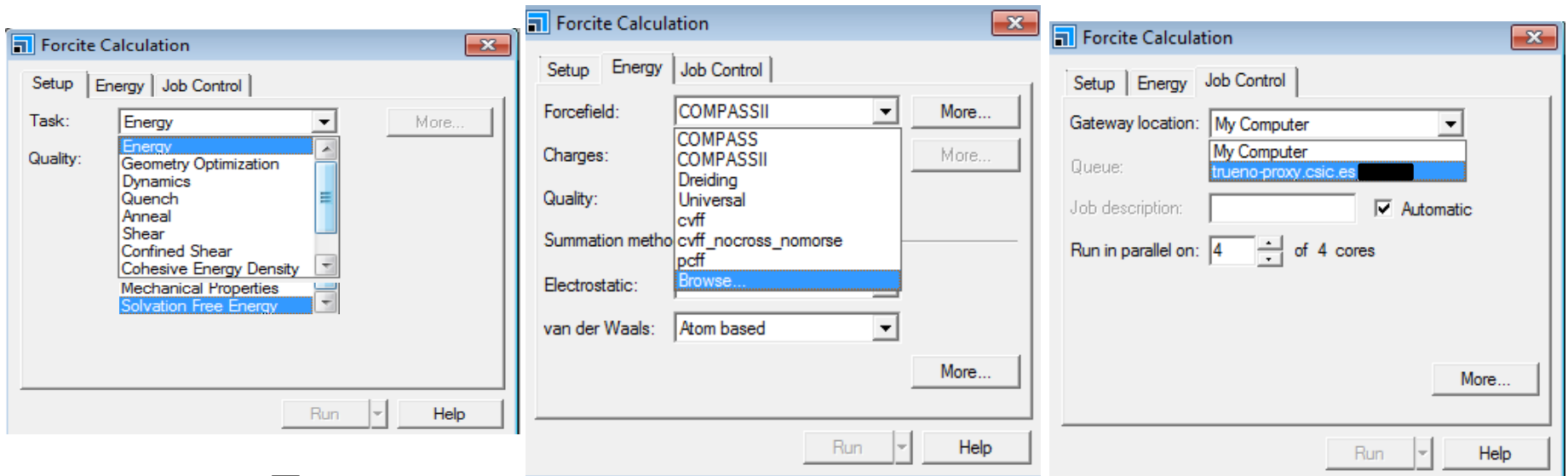
- No se pueden estudiar reacciones químicas que conlleven formación y/o ruptura de enlaces.
- No se pueden calcular propiedades que dependan de la configuración electrónica (ej: espectros electrónicos, estados excitados, ...).
- Sistemas biológicos (proteínas, péptidos, ...) no son adecuados para Forcite. Orientación a materiales.
- Dificultad para extraer las trayectorias a otros formatos.
- Limitación en la modificación y/o definición de nuevos parámetros y potenciales interatómicos.

Mecánica y Dinámica Molecular en Materials Studio : FORCITE



FORCITE - Calculation

Da acceso a la configuración del calculo y ejecutar la simulación usando Forcite



Elección del tipo y calidad
del calculo

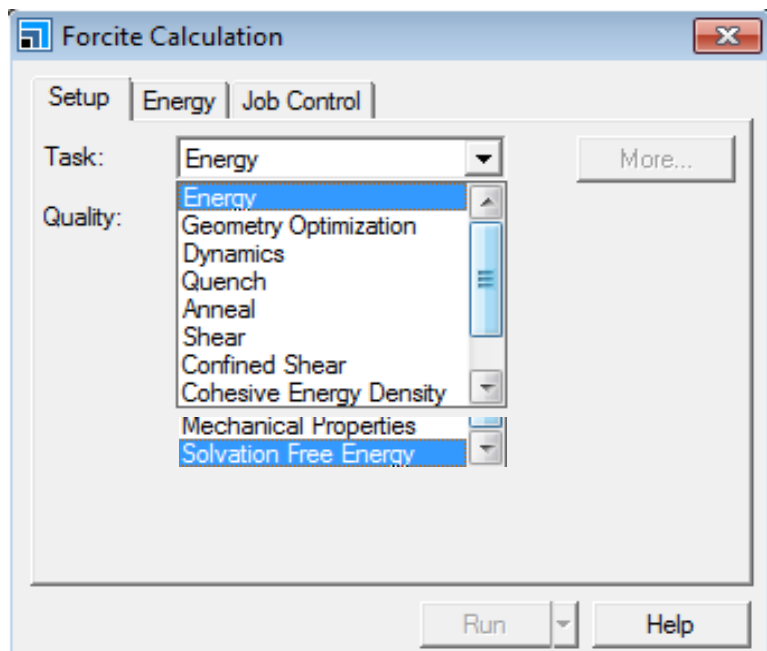


Elección del potencial interatómico
(Forcefield), definición de cargas y
opciones de calculo de las interacciones
no-enlazantes



Permite seleccionar el
servidor y aspectos
computacionales de la
simulación

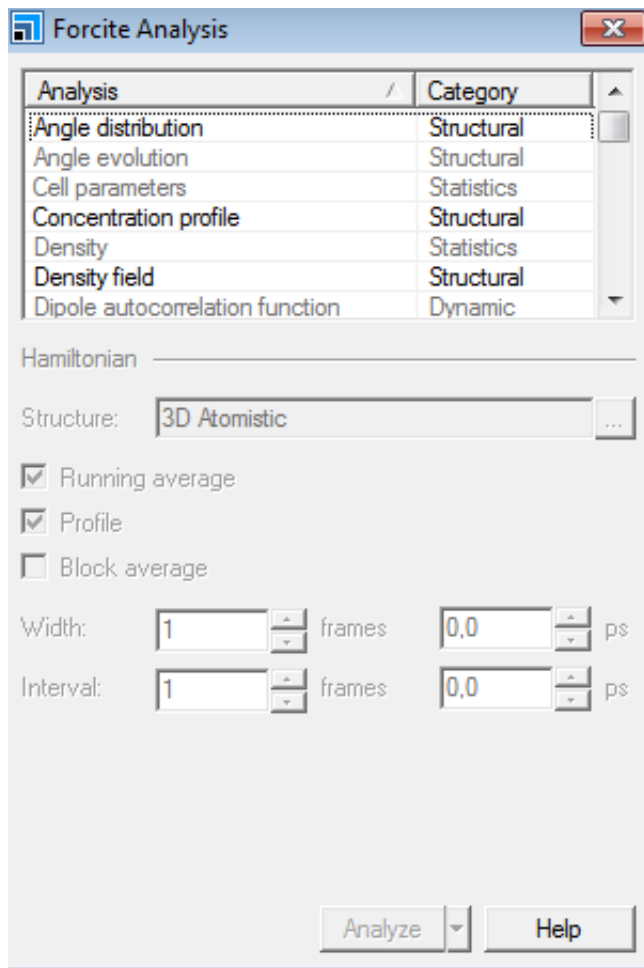
FORCITE - Calculation



- **Energy.** It allows you to calculate the total energy of the specified system
- **Geometry Optimization.** It allows you to refine the geometry of a structure until it satisfies certain specified criteria.
- **Dynamics.** It allows you to simulate how the atoms in a structure will move under the influence of computed forces
- **Quench** It allows you to search conformational space for low energy structures by sampling at fixed points along a classical trajectory
- **Anneal.** It allows you explore conformational space for low energy structures by periodically increasing and then decreasing the temperature to avoid trapping the structure in a conformation
- **Shear.** It allows you to run a dynamics simulation in the presence of a shear flow
- **Confined shear.** It performs shearing of liquids and oligomers between *fixed* surfaces
- **Cohesive Energy Density** It allows you to calculate the cohesive energy per unit volume and the solubility parameter
- **Mechanical Properties** It allows you to calculate mechanical properties for a single structure
- **Solvation Free Energy**

FORCITE - Analysis

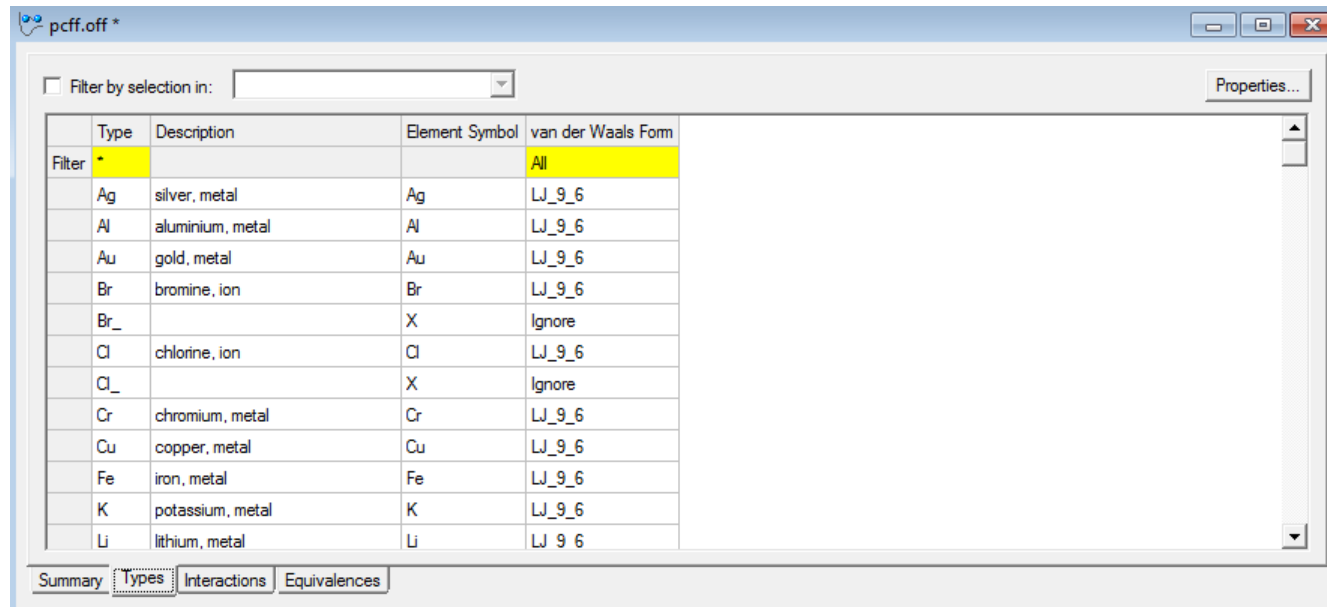
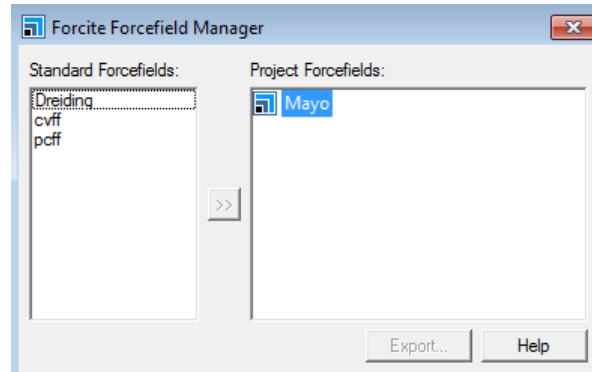
Permite el acceso a los programas de análisis de trayectorias calculadas con Forcite



- [Angle evolution](#)
- [Cell parameters](#)
- [Concentration profile](#)
- [Density](#)
- [Density field](#)
- [Dipole autocorrelation function](#)
- [Fluctuation properties](#)
- [Hamiltonian](#)
- [Length distribution](#)
- [Length evolution](#)
- [Mean square displacement](#)
- [Potential energy components](#)
- [Pressure](#)
- [Radial distribution function](#)
- [Radius of gyration](#)
- [Radius of gyration evolution](#)
- [Rotational time correlation function](#)
- [Scattering](#)
- [Space time correlation function](#)
- [Spatial orientation correlation function](#)
- [Stress autocorrelation function](#)
- [Temperature](#)
- [Temperature profile](#)
- [Torsion distribution](#)
- [Torsion evolution](#)
- [Total kinetic energy](#)
- [Velocity autocorrelation function](#)
- [Velocity profile](#)
- [View data in a study table](#)

FORCITE – ForceField Manager

Informa y permite editar (de forma muy limitada) los campos de fuerzas disponibles por el usuario



Ejemplo 1 - Politiofenos

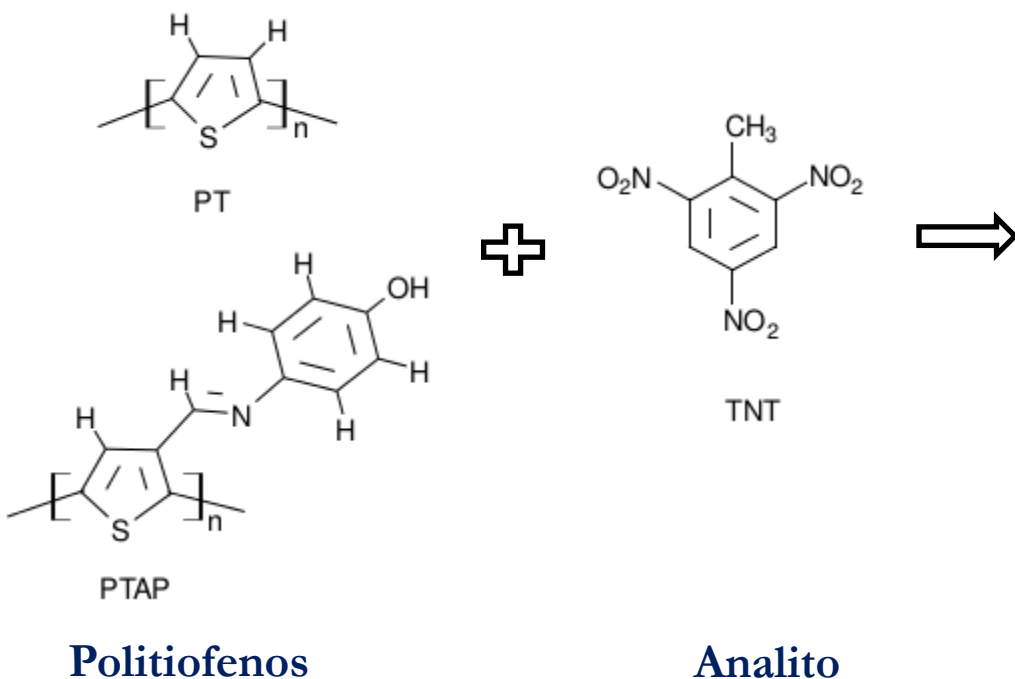
Molecular Simulation

Vol. 36, No. 1, January 2010, 63–68



Molecular dynamics simulations on polythiophenes for chemical sensing applications

V.D. Ghule^a, S. Radhakrishnan^{b*}, P.M. Jadhav^b and T. Soman^b



Interacción de un analito con
tiofenos sustituidos en la
posición 3. Aplicación en el
desarrollo de multisensores

Ejemplo 1 - Politiofenos

1. Dibujar y optimizar con FORCITE el PT, el PTAP y el TNT con las herramientas de construcción molecular. de MS.
2. Construir una caja de simulación con 10 cadenas de grado polimerización 10 para el PT y el PTAP.
3. Protocolo de equilibración del PT y PTAP
4. Resultados y análisis de una MD de 1ns.
5. Adicción del analito TNT a cada uno de los polímeros. Equilibración y producción de trayectorias.
6. Análisis de las diferencias entre los sistemas estudiados. .
 1. Protocolo de equilibración
 - a. Optimización geométrica
 - b. NVT-MD, 750K, 30 ps
 - c. NVT-MD, 600K, 20 ps
 - d. NVT-MD, 450K, 20 ps
 - e. NVT-MD, 303 K, 100 ps
 - f. NPT-MD, 303K ,100 ps
 2. Protocolo de producción, NPT-MD, 303K, 1000 ps.

Ejemplo 2 – Líquidos iónicos

Molecular Simulation

Vol. 34, Nos. 10–15, September–December 2008, 1167–1175

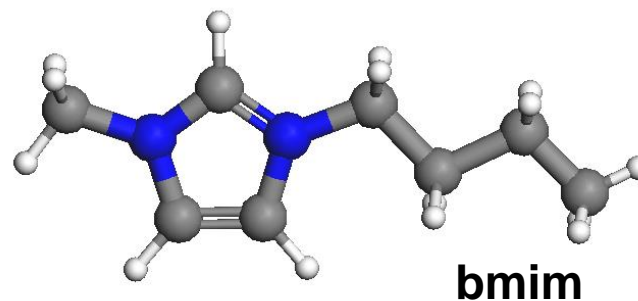
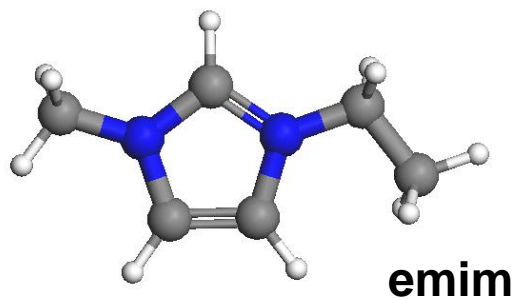


Molecular modelling simulations to predict density and solubility parameters of ionic liquids

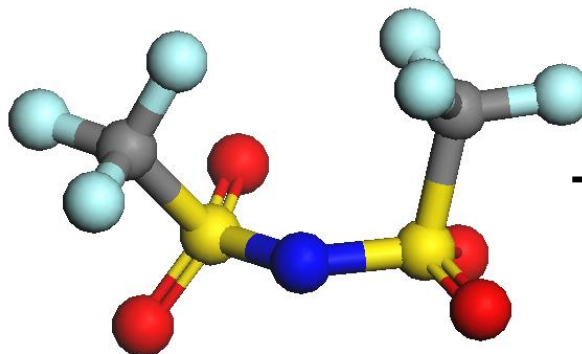
Bela Derecskei* and Agnes Derecskei-Kovacs

Millennium Inorganic Chemicals, A Cristal Company, Research Center, Baltimore, USA

CATION



ANION



TF₂N (CF₃SO₂)₂N

Ejemplo 2 – Líquidos iónicos

1. Dibujar y optimizar con FORCITE el emim, bmim y t2fn con las herramientas de construcción molecular. de MS.
2. Construir una caja de simulación con 20 cationes y 20 aniones
3. Optimizar la geometría
4. Dinámica molecular de 100 ps en NPT
5. Calcular la densidad y los parámetros de solubilidad

Gracias por vuestra atención

¿Preguntas? Y sugerencias para próximos webinars

j.ramos@iem.cfmac.csic.es